

De biomassabehoefte van de chemische industrie in een *bio-based economy*

Inschattingen gebaseerd op drie ideaaltypische technologische scenario's
BO-12.05-002-030

Rolf Blaauw
Harriëtte Bos
Jaap van Hal (ECN)
Değer Saygın (UU)
Martin Patel (UU)

Rapport nr. 1376



De biomassabehoefte van de chemische industrie in een *bio-based economy*

Inschattingen gebaseerd op drie ideaaltypische technologische scenario's

BO-12.05-002-030

Rolf Blaauw
Harriëtte Bos
Jaap van Hal (ECN)
Değer Saygın (UU)
Martin Patel (UU)

Rapport nr. 1376

Colofon

| | |
|------------------|--|
| Titel | De biomassabehoeft van de chemische industrie in een bio-based economy |
| Auteur(s) | R. Blaauw; H.L. Bos; J. van Hal; D. Saygin; M.K. Patel |
| Nummer | 1376 |
| ISBN-nummer | 978-94-6173-489-1 |
| Publicatiedatum | Januari 2013 |
| Vertrouwelijk | Nee |
| OPD-code | 6220021800 |
| Goedgekeurd door | Bert Annevelink |

Wageningen UR Food & Biobased Research
P.O. Box 17
NL-6700 AA Wageningen
Tel: +31 (0)317 480 084
E-mail: info.fbr@wur.nl
Internet: www.wur.nl

© Wageningen UR Food & Biobased Research, instituut binnen de rechtspersoon Stichting Dienst Landbouwkundig Onderzoek

Alle rechten voorbehouden. Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand of openbaar gemaakt in enige vorm of op enige wijze, hetzij elektronisch, hetzij mechanisch, door fotokopieën, opnamen of enige andere manier, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgever. De uitgever aanvaardt geen aansprakelijkheid voor eventuele fouten of onvolkomenheden.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system of any nature, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publisher. The publisher does not accept any liability for inaccuracies in this report.

Abstract

In dit rapport wordt een inschatting gemaakt van de totale toekomstige behoefte van de petrochemische industrie in Europa aan biomassa voor het maken van chemicaliën en materialen, en het genereren van de procesenergie die daarvoor nodig is. Hierbij wordt uitgegaan van de volledige overstap van nafta, de huidige grondstof van de petrochemische industrie, naar biomassa.

De inschatting wordt gemaakt op basis van drie verschillende ideaaltypische scenario's volgens fundamenteel verschillende technologische routes. De scenario's gaan alle uit van biomassa bestaande uit lignocellulose samengesteld uit lignine (25%), cellulose (50%) en hemicellulose (25%). De scenario's zijn:

(1) vergassing van biomassa naar synthesegas ('syngas': koolmonoxide en waterstofgas) gevolgd door koolwaterstofvormende processen naar de bestaande basischemicaliën ethyleen, propyleen, C-4 olefines, en de aromaten benzeen, toluen en xyleen (BTX). Lignine dient als brandstof voor procesenergie;

(2) de scheiding van biomassa tot suikers en lignine, gevolgd door de fermentatie van suikers naar ethanol en butanol en vervolgens naar de bestaande C-2, C-3 en C-4 basischemicaliën (zie boven), en chemische omzetting van lignine naar BTX;

(3) biomassascheiding gevolgd door fermentatie van suikers naar melkzuur en vervolgens naar het plastic polymelkzuur (PLA), en gebruik van lignine voor procesenergie en overige niet-polymere chemicaliën.

Er wordt aangetoond dat in scenario 3 minder biomassa nodig is dan in scenario's 1 en 2, vanwege het behoud van (een deel van) in biomassa aanwezige zuurstofatomen in de eindproducten. Hierbij moet wel worden aangetekend dat via deze route niet het volledige huidige productenpalet van de chemische industrie kan worden geproduceerd.

Mocht de Europese petrochemische industrie erin slagen om in 2030 volledig overgeschakeld te zijn naar biomassa, dan ligt de *minimale* behoefte aan biomassa, afhankelijk van onder meer de omvang, processen, en producten van de industrie in 2030, tussen de 120 en 320 miljoen ton.

Inhoudsopgave

| | |
|--|-----------|
| Abstract | 3 |
| 1 Inleiding | 5 |
| 2 Gehanteerde scenario's en aannames | 7 |
| 2.1 Het belang van koolstofefficiëntie bij de omschakeling van nafta naar biomassa | 7 |
| 2.2 De behoefte aan biomassa volgens drie ideaaltypische scenario's | 9 |
| 3 Resultaten | 13 |
| 3.1 Scenario 1. Biomassavergassing | 13 |
| 3.2 Scenario 2: biomassafermentatie | 14 |
| 3.3 Scenario 3: koolstof-efficiënte fermentatie van suikers naar 'all-purpose' PLA | 16 |
| 4 Discussie en conclusie | 18 |
| 4.1 Inleiding | 18 |
| 4.2 Verschillen tussen scenario 1 en 2 | 19 |
| 4.3 Koolstofefficiency in de biobased chemie. | 19 |
| 4.4 Het verschil in energie-efficiency tussen de scenario's. | 19 |
| 4.5 Grondstofdiversificatie onder scenario 3. | 20 |
| 5 Literatuur | 21 |

1 Inleiding

Vanwege de onafwendbare uitputting van de aardolie-, aardgas en steenkoolreserves en het feit dat deze grondstoffen slechts in een beperkt aantal landen op grote schaal te verkrijgen zijn, hebben veel overheden zich tot doel gesteld om een zogenaamde 'biobased economy' (BBE) te ontwikkelen. In een BBE wordt biomassa niet alleen gebruikt als bron voor voedsel, maar ook als belangrijkste grondstof voor de productie van chemicaliën, materialen, en energie (brandstoffen, elektriciteit en warmte).

Vanuit de programmadirectie BbE van EZ is een studie uitgezet naar de logistieke consequenties van deze toenemende vraag naar biomassa en de veranderende afnemers. Voor het gebruik van biomassa als energiedrager (zowel voor transportbrandstoffen als voor elektriciteit en warmte) zijn veel studies gedaan naar de verwachte vraag. Voor de verwachte vraag van de chemische industrie zijn nog vrijwel geen studies beschikbaar. Dit is de belangrijkste reden dat de logistiek studie halverwege de looptijd is uitgebreid met een kort onderzoek naar de verwachte vraag van de chemie in Nederland en Europa. Om een beeld te krijgen van de maximale consequenties van deze extra vraag is gerekend met ideaaltypische scenario's die de maximale vraag van de chemie in kaart proberen te brengen.

Los van de logistieke aspecten zijn de vragen hoeveel biomassa en landbouwareaal er nodig zijn in een volledig ontwikkelde BBE, en of er realistische opties zijn voor de productie van de benodigde hoeveelheden biomassa zeer belangrijk. De uitkomsten van deze vragen kunnen consequenties hebben voor het gevoerde beleid.

De meeste studies die zich met bovenstaande vragen bezighouden richten zich op de productie van bio-energie. Dit is op zich logisch, omdat fossiele grondstoffen hoofdzakelijk worden gebruikt voor het maken van brandstoffen en het genereren van elektriciteit en warmte. Ook het huidige EU-beleid is gericht op hernieuwbare energie, en niet op hernieuwbare chemicaliën en materialen. Aan de andere kant bestaan er voor de productie van de meeste vormen van energie alternatieven voor het gebruik van biomassa, zoals zonlicht en wind. Voor chemicaliën en materialen is dat niet het geval. Bovendien kan de petrochemische industrie in principe veel efficiënter met biomassa, en dus met landgebruik, omgaan dan de energiesector, door een productportfolio na te streven waarin zoveel mogelijk van de in biomassa al aanwezige chemische functionaliteit (in de vorm van met name koolstof-zuurstofbindingen) behouden blijft. Dit is moeilijker te realiseren in bijvoorbeeld de brandstofsector, waar voor het realiseren van een goede verbrandingswaarde zoveel mogelijk zuurstof uit biomassa moet worden verwijderd. Ook met betrekking tot de reductie van uitstoot van broeikasgassen is het intact laten van koolstof-zuurstofbindingen in biomassa wenselijk, omdat hierdoor minder CO₂ zal worden afgesplitst.

Over de toekomstige behoefte van de petrochemische industrie aan biomassa bestaan zeer weinig gegevens. Deze korte studie heeft zich daarom tot doel gesteld om in te schatten hoeveel biomassa deze industrie in Europa nodig heeft bij volledige uitfasering van aardoliefracties als grondstof voor haar producten en procesenergie.

Hoofdstuk 2 van dit rapport beschrijft meer in detail de drie verschillende scenario's die zijn gevolgd. Hoofdstuk 3 behandelt de resultaten van de berekeningen. In dit hoofdstuk is veel ruimte ingebouwd voor de beschrijving van de stoichiometrie van de chemische reacties die zijn onderzocht, omdat dit de basis is waarop de berekeningen zijn gebaseerd. Hoofdstuk 4 beschrijft in meer kwalitatieve zin de uitkomsten van de scenarioberekeningen en is ook zonder hoofdstuk 3 leesbaar. Tevens worden in hoofdstuk 4 nog een aantal andere relevante aspecten van de verschillen tussen de scenario's belicht en een vergelijking gemaakt met een andere studie. Hoofdstuk 5 tenslotte bevat de conclusies.

Een uitgebreide verfijning van het derde scenario dat door de universiteit van Utrecht is opgesteld is te vinden in een aparte appendix A. In dit scenario wordt in meer detail ingegaan op de verschillende producten die zouden moeten worden vervangen en hoe dit vanuit biomassa zou kunnen worden verwezenlijkt.

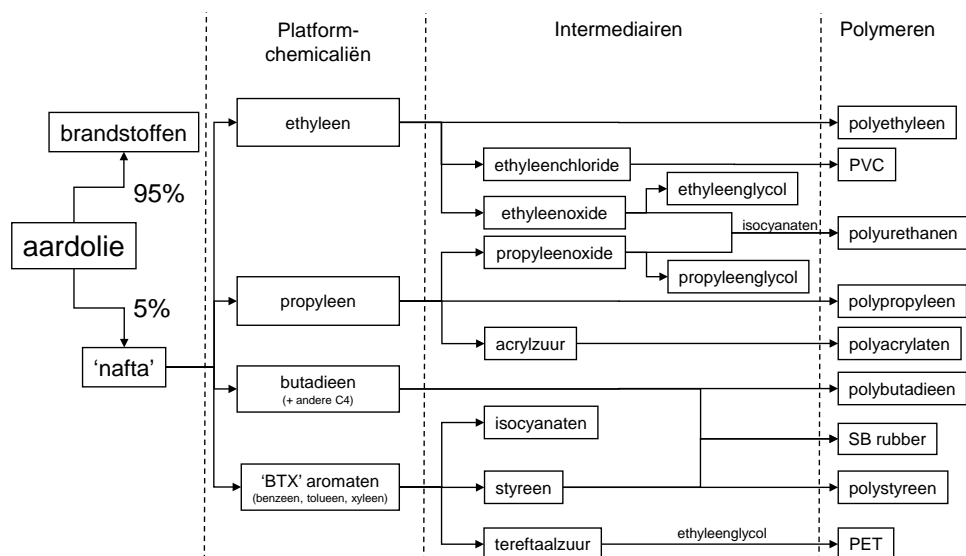
Op basis van de in dit rapport beschreven aanpak is het mogelijk om een uitgebreide scenariostudie op te zetten waarbij de impact van verschillende toekomstbeelden op industrie, logistiek en agro in kaart kan worden gebracht. Een dergelijke studie kan handvatten leveren voor de Nederlandse overheid (en de EU) om het beleid met betrekking tot het gebruik van biomassa voor chemie en energie vorm te geven.

2 Gehanteerde scenario's en aannames

Omdat de chemische industrie in Europa sterk geïntegreerd is (o.a. gekenmerkt door landsgrens overschrijdende pijpleidingen van enkele basischemicaliën) en het lastig is productiegegevens van de petrochemische industrie in Nederland te vinden, richt deze studie zich op de Europese markt (EU-27).

2.1 Het belang van koolstofefficiëntie bij de omschakeling van nafta naar biomassa

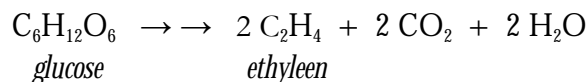
Om een inschatting te kunnen maken van de hoeveelheid biomassa die de petrochemische industrie nodig heeft moet eerst de huidige behoefte aan koolstof (d.w.z. koolstofatomen als belangrijkste bestanddeel van organische chemicaliën) worden bepaald. De productie van organische chemicaliën uit aardolie is gebaseerd op slechts een handvol platformchemicaliën van waaruit alle andere chemicaliën en kunststoffen worden geproduceerd: ethyleen, propyleen, butadien (en andere C-4 olefinen), en de aromatische verbindingen benzeen, toluen en xyleen (BTX). Daarnaast is methanol een belangrijk basisproduct, gemaakt uit aardgas (voornamelijk methaan). Een vereenvoudigd schema van routes naar enkele belangrijke chemicaliën en kunststoffen staat weergegeven in Figuur 2.1.



Figuur 2.1. Routes naar enkele belangrijke chemische producten uit aardolie.

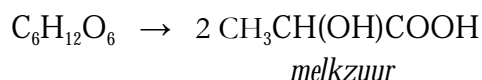
Productievolumes van de platformchemicaliën, inclusief methanol, bedroegen in 2010 naar schatting ca. 60 miljoen ton (Tabel 2.1). In scenario's waarin deze zelfde basischemicaliën worden gemaakt uit biomassa zullen processen moeten worden gehanteerd waarmee alle zuurstof uit de biomassa wordt 'gesloopt'. De hoeveelheid biomassa die daarvoor nodig is zal veel hoger zijn dan de hoeveelheid nafta die daar nu voor wordt gebruikt, vanwege het hoge aandeel van zuurstof-

atomen in biomassa (ruwweg de helft van het gewicht van biomassa). Zo kan uit 100 miljoen ton glucose maximaal slechts 31 miljoen ton ethyleen (via ethanol uit fermentatie) worden gemaakt, doordat in dit proces kooldioxide en water worden afgesplitst:



Hetzelfde geldt als glucose niet via fermentatie naar ethanol maar via vergassing tot synthesegas (hoofdzakelijk CO en H₂) wordt omgezet naar ethyleen; ook dan kan uit 100 miljoen ton glucose niet meer dan 31 miljoen ton ethyleen worden gemaakt. De netto stoichiometrie is namelijk voor beide processen dezelfde.

De koolstofefficiëntie ligt hoger als producten worden nagestreefd waarvan de productie niet gepaard gaat met de afsplitsing van CO₂. Een voorbeeld is melkzuur verkregen uit de fermentatie van glucose; hierbij komt alle koolstof in het eindproduct terecht:



In dit geval kan uit 100 miljoen ton glucose maximaal 100 miljoen ton melkzuur worden geproduceerd. In werkelijkheid zullen de opbrengsten iets lager zijn, maar het voorbeeld geeft goed aan dat het maken van gefunctionaliseerde chemische bouwstenen als melkzuur vanuit het oogpunt van efficiënt gebruik van biomassa en dus landbouwareaal grote voordelen biedt ten opzichte van het maken van de bestaande koolwaterstoffen die nu de basis vormen van de petrochemische industrie.

Tabel 2.1. Huidige (2010) productievolumes (in miljoen ton) van platformchemicaliën in de EU-27.

| | |
|---------------|-------------|
| Ethyleen | 22,2 |
| Propyleen* | 16,7 |
| Butadieen | 3,0 |
| Butylenen | 2,4** |
| Benzeen* | 8,4 |
| Tolueen* | 2,0 |
| Xylenen* | 2,5 |
| Methanol | 3,0 |
| TOTAAL | 60,2 |

* Totale hoeveelheid van stoomkraken en opwerking van raffinagefracties.

** Eurostat 2007.

Daar komt nog bij dat het functionaliseren van de basis koolwaterstoffen om te komen tot de intermediären en de eindproducten, zoals dat nu in de chemische industrie gebeurt, relatief veel energie kost. Wanneer uit biomassa de reeds gefunctionaliseerde moleculen kunnen worden gewonnen is deze procesenergie niet nodig.

2.2 De behoefte aan biomassa volgens drie ideaaltypische scenario's

Het maken van een nauwkeurige inschatting van de vraag naar biomassa door de petrochemische industrie in een volledig ontwikkelde BBE is onmogelijk. Het scala aan verschillende chemische producten is te groot, de processen volgens welke ze gemaakt worden zijn te verschillend, veel gegevens ontbreken, en veel processen om uit biomassa bouwstenen voor de chemie te maken zijn nog niet (uit)ontwikkeld. Daarom wordt hier een ruwe inschatting gemaakt volgens enkele sterk vereenvoudigde ideaaltypische scenario's die elk op minstens één punt wezenlijk van elkaar verschillen. Verder wordt ervan uitgegaan dat de BBE in 2030 gerealiseerd zal zijn. Voor de omvang van de petrochemische industrie in de EU-27 in 2030 ten opzichte van die in 2010 wordt uitgegaan van drie groeiscenario's, kort uitgelegd in Tabel 2.2. De productievolumes van platformchemicaliën en polymeren behorende bij de drie groeiscenario's staan weergegeven in Tabel 2.3.

Tabel 2.2. Aannames voor groei van de productie van platformchemicaliën en polymeren in de EU-27 in 2030 t.o.v. 2010 (Broeren et al. 2012).

| <i>Groeiscenario 2010→2030:</i> | <i>Krimp</i> | <i>Matige groei</i> | <i>Sterke groei</i> |
|-------------------------------------|--|---|---|
| Groei per jaar: | -1,7% (chem.) -0,7% (polym.) | -0,2% (chem.) 0,6% (polym.) | 1,4% (chem.) 1,9% (polym.) |
| Aannames (chemicaliën): | Nieuwe fabrieken met name in goedkope landen; beperkte verschuiving van productie; import is goedkoop; matige verbeteringen van procesefficiëntie (1%/j) | Idem als krimpscenario, maar import is duurder en daarom beperkt | Idem als matige-groei-scenario; fossiele brandstofprijzen in Europa blijven gelijk of dalen, waardoor de EU competitiever wordt als producent van chemicaliën |
| Effect (chemicaliën): | EU importeert veel voor eigen consumptie. | EU produceert voor eigen consumptie, maar exporteert niet of nauwelijks omdat het geen goedkope producent is. | EU produceert voor eigen consumptie en exporteert ook. |
| Effect (polymeren): | EU importeert meer intermediaire chemicaliën om polymeren van te maken, aangezien de polymerenmarkt sneller groeit dan de markt voor platformchemicaliën | | |
| Opmerkingen: | | Komt overeen met OECD groeiscenario's voor Europa (IEA 2009) | Komt overeen met Nederlandse groeiscenario's (ECN/PBL 2010) |

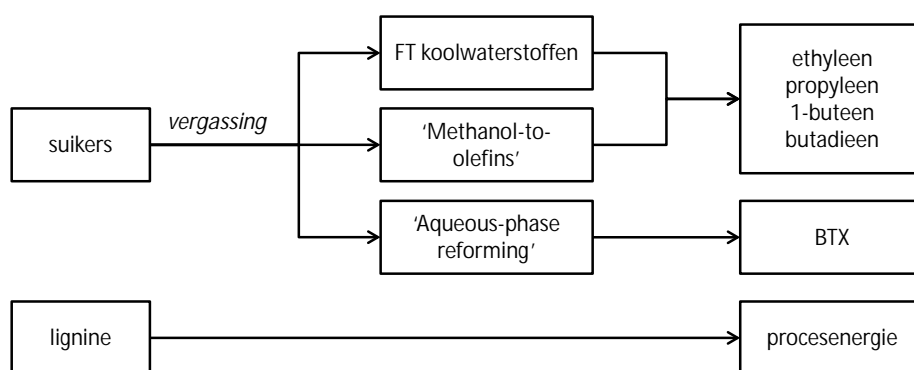
Tabel 2.3 Productievolumes van platformchemicaliën en polymeren in 2010 en 2030.

| | 2010 | 2030 | | |
|----------------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| | | Krimp | Lage groei | Sterke groei |
| | (kt/j) | (kt/j) | (kt/j) | (kt/j) |
| Platformchemicaliën | | | | |
| Ethyleen | 22.183 | 15.649 | 21.463 | 29.293 |
| Propyleen (stoomkraken) | 13.648 | 9.628 | 13.205 | 18.023 |
| Propylene (raffinaderij) | 3.029 | 2.137 | 2.930 | 4.000 |
| Butadieen | 2.989 | 2.108 | 2.892 | 3.947 |
| Butylenen* | 2.400 | 1.680 | 2.300 | 3.100 |
| Aromaten (stoomkraken) | 5.326 | 3.757 | 5.153 | 7.033 |
| Benzeen | 3.164 | 2.232 | 3.061 | 4.178 |
| Tolueen | 943 | 665 | 912 | 1.245 |
| Xylenen | 1.219 | 860 | 1.180 | 1.610 |
| Aromatens (raffinaderij) | 7.610 | 5.368 | 7.363 | 10.049 |
| Benzeen | 5.265 | 3.714 | 5.094 | 6.952 |
| Tolueen | 1.024 | 722 | 991 | 1.352 |
| <i>o</i> -xyleen | 270 | 191 | 262 | 357 |
| <i>p</i> -xyleen | 1.054 | 744 | 1.020 | 1.392 |
| TOTAAL | 57.183 | 40.327 | 55.306 | 75.705 |
| Methanol | 2.957 | 2.086 | 2.861 | 3.904 |
| Polymeren | | | | |
| LD Polyethyleen | 8.840 | 7.636 | 9.935 | 12.881 |
| HD Polyethyleen | 6.240 | 5.390 | 7.013 | 9.092 |
| Polypropyleen | 9.880 | 8.534 | 11.103 | 14.396 |
| PVC | 6.760 | 5.839 | 7.597 | 9.850 |
| Polystyreen | 3.640 | 3.144 | 4.091 | 5.304 |
| PET | 3.640 | 3.144 | 4.091 | 5.304 |
| Polyurethanen | 3.120 | 2.695 | 3.506 | 4.546 |
| Polyamides | 907 | 783 | 1.019 | 1.321 |
| ABS | 679 | 586 | 763 | 989 |
| Polycarbonaten | 353 | 305 | 397 | 514 |
| PBT | 189 | 163 | 213 | 276 |
| Polymethylmethacrylaat | 214 | 185 | 241 | 312 |
| Andere polyacrylaten | 215 | 186 | 242 | 314 |
| Epoxyharsen | 389 | 336 | 437 | 566 |
| Synthetische rubbers | 1.901 | 1.642 | 2.137 | 2.771 |
| Overig | 5.032 | 4.347 | 5.655 | 7.332 |
| TOTAAL polymeren | 52.000 | 44.917 | 58.437 | 75.768 |
| Vezels | | | | |
| PET | 1.343 | 1.160 | 1.509 | 1.957 |
| Polyamides | 598 | 517 | 672 | 871 |
| Acrylvezels | 664 | 574 | 746 | 968 |
| Overig | 1.174 | 1.014 | 1.319 | 1.711 |
| TOTAAL vezels | 3.779 | 3.264 | 4.247 | 5.506 |

* Schatting op basis van gegevens van Eurostat uit 2007.

Scenario 1. Vergassing van lignocellulose-biomassa naar bestaande platformchemicaliën

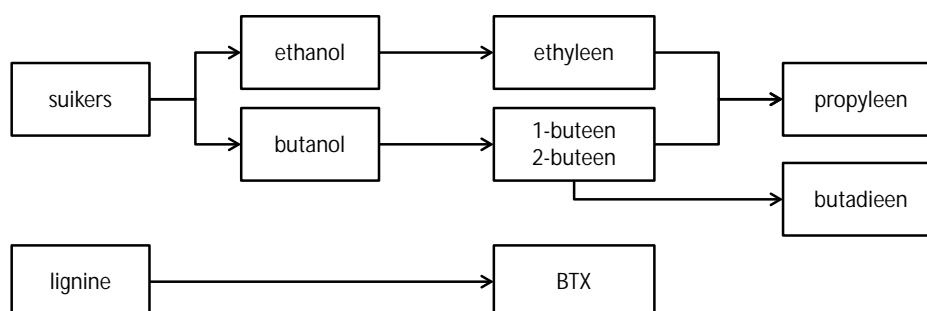
In dit scenario worden de bestaande platformchemicaliën (Tabel 2.1) gemaakt door de cellulose- en hemicellulosefractie van biomassa te vergassen tot synthesegas (koolmonoxide en waterstofgas) om vervolgens hieruit (na optimalisatie van de CO/H₂-verhouding door reactie van water met CO tot CO₂ en H₂) de gewenste koolwaterstoffen te maken. De ligninefractie wordt gebruikt om procesenergie te genereren. Alle zuurstof wordt uit de biomassa verwijderd. Lignine wordt gescheiden van de suikers om het in te kunnen zetten als energiebron voor de chemische processen. Deze scheiding is niet *per se* nodig; de biomassa kan ook als geheel worden vergast.



Figuur 2.2. Productie van chemicaliën volgens scenario 1.

Scenario 2. Fermentatie van suikers naar ethanol en butanol, gevolgd door thermochemische omzetting naar bestaande platformchemicaliën

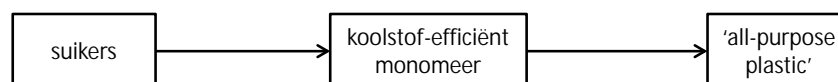
Hierbij worden suikers en lignine van elkaar gescheiden, en worden de suikers vervolgens niet thermochemisch, maar middels fermentatie omgezet naar ethanol en butanol (twee bekende bio-brandstoffen), welke daarna door thermische dehydratatie worden geconverteerd naar respectievelijk ethyleen en een mengsel van 1-buteen en 2-buteen. Uit dit butyleenmengsel kan butadieen worden gemaakt. Reactie van ethyleen met 2-buteen levert propyleen. De aromatische platformchemicaliën worden gemaakt uit lignine (door technologie die nu op R&D-niveau wordt ontwikkeld). Additionele biomassa is nodig voor het genereren van de benodigde procesenergie.



Figuur 2.3. Productie van chemicaliën volgens scenario 2.

Scenario 3. Koolstof-efficiënte fermentatie van suikers naar zuurstofhoudende monomeren, waaruit polymeren kunnen worden gemaakt die de huidige plastics kunnen vervangen.

In dit scenario nemen we aan dat er in 2030 plastics zijn ontwikkeld met een relatief hoog zuurstofgehalte die niet alleen de huidige zuurstofhoudende plastics kunnen vervangen (PET, polyurethanen, polyamides, e.d.), maar ook de op dit moment grootste categorie van zuurstofvrije plastics (polyethyleen, polypropyleen, PVC, polystyreen, en synthetische rubbers; samen zo'n 70% van alle plastics). Voor het gemak gaan we ervan uit dat het om polymelkzuur (PLA) gaat dat nu ook al commercieel wordt geproduceerd. Melkzuur, de bouwsteen voor PLA, is een fermentatieproduct van suikers waarin alle koolstof en zuurstof behouden zijn gebleven: $C_6H_{12}O_6 \rightarrow 2 C_3H_6O_3$. Bij de polymerisatie van melkzuur naar PLA komt alleen water vrij. We gaan er in dit scenario van uit dat aan PLA een breed scala aan eigenschappen kan worden gegeven; een 'all-purpose' plastic, en dat alle huidige kunststoffen kan vervangen. Lignine wordt omgezet in overige chemicaliën (niet-plastics) en wordt gebruikt voor het leveren van procesenergie.



Figuur 2.4. Productie van chemicaliën volgens scenario 3.

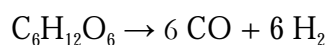
De rationale achter dit scenario is dat circa 80% van de huidige productie van de petrochemische industrie bestaat uit plastics.

Voor alle scenario's gaan we ervan uit dat de reacties optimaal kunnen worden uitgevoerd; opbrengsten van elke reactiestap zijn 100%, en de theoretische stoichiometrie wordt gevolgd. De hoeveelheden biomassa die uit de berekeningen komen zijn dan ook *minimale* hoeveelheden.

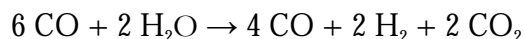
3 Resultaten

3.1 Scenario 1. Biomassavergassing, hoge-temperatuur scenario

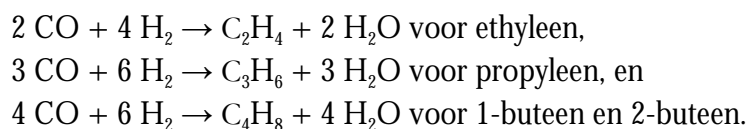
Om de hoeveelheid biomassa te bepalen die nodig is om de huidige platformchemicaliën te maken is de stoichiometrie van de reactievergelijkingen nodig. Er wordt hierbij voor het gemak steeds alleen gerekend met glucose en niet met xylose, omdat het in termen van gewicht niet uitmaakt. De stoichiometrie is voor vergassing van glucose naar koolmonoxide en waterstofgas als volgt opgebouwd:



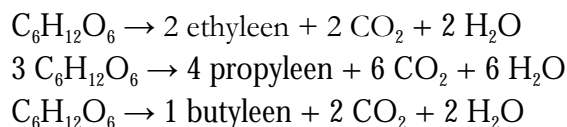
Om de verhouding tussen CO en H₂ te krijgen die nodig is om ethyleen, propyleen en butyleen te maken moet een deel van de CO door reactie met water worden omgezet naar extra H₂. Hierbij wordt ook CO₂ gevormd:



Nu is de juiste verhouding tussen CO en H₂ verkregen (1 : 2) om ethyleen, propyleen of butyleen te maken:

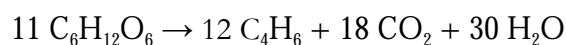


De netto-reacties worden dan:



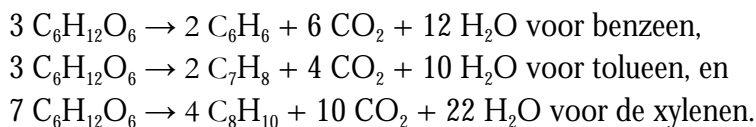
In gewicht uitgedrukt zijn er voor bovenstaande olefines geen verschillen: uit 100 ton glucose (of xylose) kan 31 ton ethyleen, propyleen of butyleen worden gemaakt.

Voor butadieen is de stoichiometrie iets anders (er ontstaat iets minder CO₂ en meer water, dus de koolstofefficiëntie is iets beter):



Er kan uit 100 ton glucose 33 ton butadieen worden gemaakt.

Vergelijkbare reacties kunnen worden opgesteld voor de aromaten benzeen, toluen en de xyleen-isomeren. De netto-reacties zijn als volgt:

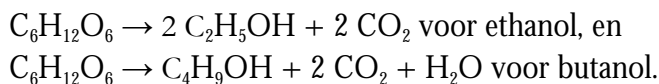


Voor ethyleen, propyleen, de butylenen en benzeen geldt dus dat er van de drie glucosemoleculen één wordt omgezet in CO_2 . Voor de overige platformchemicaliën is de koolstofefficiëntie iets beter.

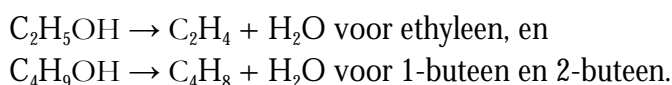
Op basis van bovenstaande reacties kunnen de hoeveelheden biomassa die voor het maken van de platformchemicaliën nodig zijn volgens de drie groeiscenario's voor 2030 worden berekend. Deze zijn 173 (*krimp*), 237 (*lage groei*) en 323 (*sterke groei*) miljoen ton. Het aandeel lignine hierin (25% van de biomassa) is respectievelijk 43, 59 en 81 miljoen ton. Dit is voldoende voor het opwekken van de benodigde procesenergie.

3.2 Scenario 2: Fermentatiescenario

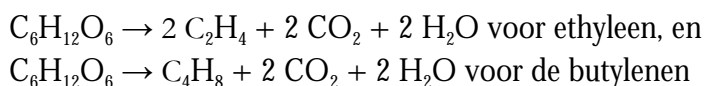
De reactievergelijkingen voor de omzetting van glucose naar respectievelijk ethanol en butanol zijn de volgende:



Voor de omzetting van ethanol en butanol naar respectievelijk ethyleen en butyleen gelden de volgende reacties:

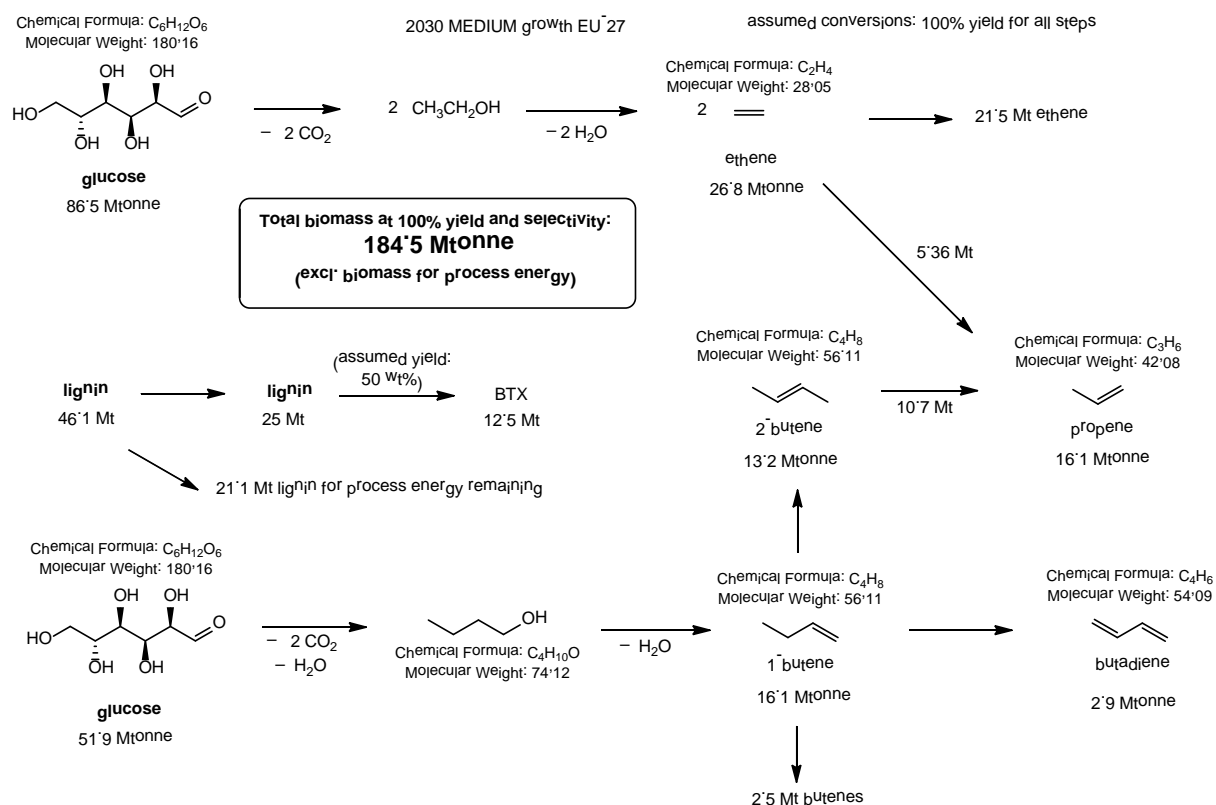


Netto wordt dat



Deze stoichiometrie is identiek aan die van vergassing van glucose naar deze producten. Omdat propyleen uit de reactie van ethyleen met 2-buteen kan worden gemaakt met 100% koolstofefficiëntie, is de stoichiometrie ook voor propyleen gelijk aan die uit vergassing. De verwachting is dan ook dat voor beide scenario's ongeveer dezelfde (minimale) hoeveelheden biomassa nodig

zijn. Kleine verschillen ontstaan doordat in *scenario 2* BTX wordt gemaakt uit lignine, en niet uit suikers (*scenario 1*). De stoichiometrie van de omzetting van lignine naar koolwaterstoffen zoals BTX is moeilijk in te schatten, omdat dergelijke processen nog niet zijn ontwikkeld. Daarom wordt hier aangenomen dat ongeveer de helft van de massa van lignine BTX kan worden, d.w.z. een halve ton BTX per ton lignine. Voor het groeiscenario 'lage groei' ziet het schema er dan als volgt uit (Figuur 3.1, in het Engels):

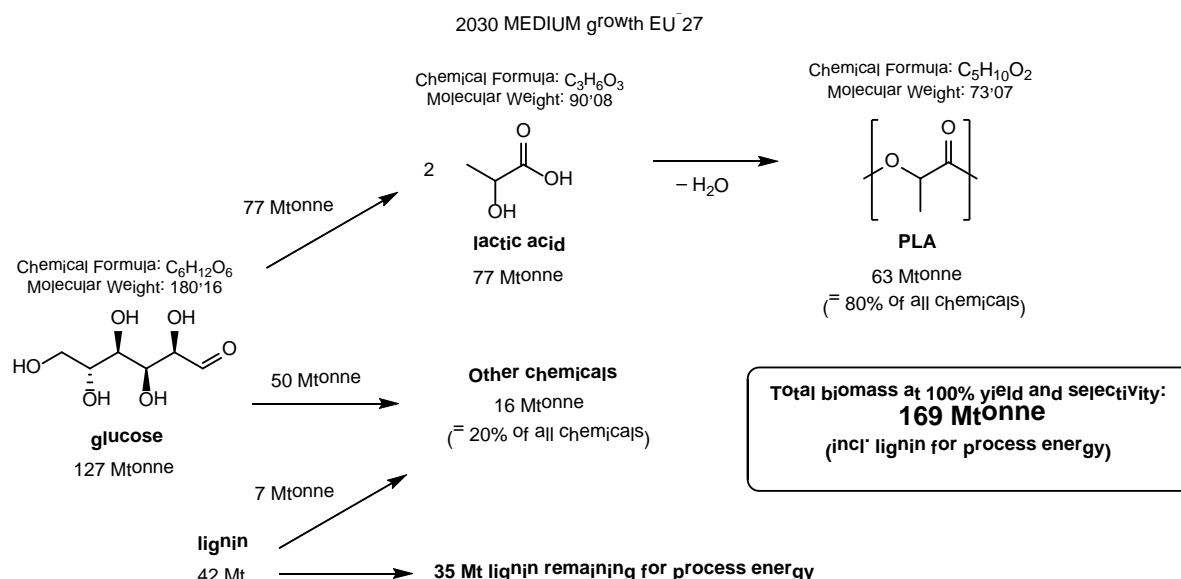


Figuur 3.1. Productie van chemicaliën uit biomassa, inclusief hoeveelheden, volgens scenario 2.

Om de in 2030 benodigde hoeveelheden platformchemicaliën te maken is, in geval van het 'lage groei'-scenario, ongeveer 185 miljoen ton biomassa nodig. Hiervan blijft zo'n 21 miljoen ton aan lignine over voor procesenergie, en dat is wat aan de lage kant (11%). Er is naar schatting nog ca. 45 miljoen ton aan additionele biomassa nodig om voldoende procesenergie te kunnen leveren. Daarmee komt het totaal op zo'n 230 miljoen ton. Voor de andere twee groeiscenario's zijn de hoeveelheden 168 (*krimp*) en 317 (*sterke groei*) miljoen ton.

3.3 Scenario 3: koolstof-efficiënte fermentatie van suikers naar 'all-purpose' PLA, functionele chemicaliën scenario

In dit geval ziet het schema er voor het scenario 'lage groei' als volgt uit (Figuur 3.2):



Figuur 3.2. Productie van chemicaliën uit biomassa, inclusief hoeveelheden, volgens scenario 3.

De benodigde (minimale) hoeveelheid biomassa is hier veel lager, omdat alle koolstof en de meeste zuurstof uit de suikers in PLA blijven zitten. Hierbij is aangenomen dat het chemische productportfolio voor 80% uit plastics (in dit geval PLA) bestaat, en de overige 20% uit andere chemische producten. Er blijft ca. 35 miljoen ton lignine over voor procesenergie, en dat lijkt in dit geval voldoende.

Een overzicht van de hoeveelheden biomassa in 2030 staat weergegeven in Tabel 3.1.

Tabel 3.1. Totale hoeveelheden lignocellulose-biomassa (75% suikers, 25% lignine) die nodig zijn om alle chemicaliën en plastics te maken in 2030 volgens drie ideaaltypische technologiescenario's en drie groeiscenario's. De waarden moeten worden beschouwd als minimale hoeveelheden, omdat aangenomen conversies en selectiviteiten van de chemische processen 100% zijn.

| <i>Scenario</i> | | <i>Biomassa</i> <i>'krimp'</i> | <i>Biomassa</i> <i>'lage groei'</i> | <i>Biomassa</i> <i>'sterke groei'</i> |
|-----------------|--|-----------------------------------|--|--|
| 1 | Vergassing + FT | 173 Mt | 237 Mt | 323 Mt |
| 2 | Fermentatie + thermochemische omzetting | 168 Mt | 230 Mt | 317 Mt |
| 3 | Fermentatie + polymerisatie naar 'all-purpose' PLA | 123 Mt | 169 Mt | 232 Mt |

De aannames van de in dit rapport gehanteerde ideaaltypische scenario's zijn hoogstwaarschijnlijk in 2030 nog niet verwezenlijkt. In werkelijkheid zullen de opbrengsten en selectiviteiten van de processen lager zijn dan 100%, en zal biomassa de huidige grondstof voor chemicaliën en kunststoffen, nafta, nog niet volledig hebben vervangen. Bovendien zal het in 2030 nog niet mogelijk zijn om de huidige plastics te vervangen door een 'all-purpose' PLA of ander bioplastic. Door de Universiteit van Utrecht (Saygin en Patel) is scenario 3 verfijnd, door te kijken naar het op dit moment technisch mogelijke vervangingspotentieel van plastics door PLA of door PBS (polybutyleensuccinaat), en het vervangingspotentieel van enkele belangrijke gefunctionaliseerde plastics (PET, polyacrylaten en polyamides) door enkele (nieuwe) bioplastics. Ze gaan hierbij uit van chemicaliën- en plasticsproductie uit *eetbare* suikers (zetmeel uit graankorrels, of suiker uit suikerriet, waarbij ze voor de laatste terugrekenen naar het totale gewas, inclusief het aanwezige water, en voor de eerste naar de korrels). De berekende hoeveelheden biomassa zijn daarom verhoudingsgewijs hoger dan in de hierboven beschreven scenario's, waarin van drogere biomassa wordt uitgegaan. De resultaten zijn in een apart rapport vervat.

4 Discussie en conclusie

4.1 Inleiding

In dit rapport is een inschatting gemaakt van de minimale hoeveelheid biomassa die nodig is om de Europese chemische industrie van grondstoffen te voorzien, ervan uitgaande dat de gehele petrochemie niet meer op aardolie draait maar op biomassa. Er zijn hiervoor drie ideaaltypische scenario's gevolgd ieder gebaseerd op een fundamenteel verschillende technologie van omzetting van de biomassa naar bouwstenen. De inschattingen zijn op hoofdlijnen gedaan, waarbij voor alle reacties wel is gekeken naar de stoichiometrie (hoeveel kun je maximaal met deze reactievergelijking maken van de gewenste stof) maar er vervolgens vanuit is gegaan dat de reactie dan ook voor 100% volledig verloopt (dit is vaak niet het geval). Dat betekent dat de hoeveelheden benodigde biomassa die hier worden gerapporteerd een *minimum* waarde geven. In werkelijkheid zal de vraag hoger liggen. Er is wel rekening gehouden met de hoeveelheid procesenergie die nodig is om de reactie te laten verlopen, ook hiervoor wordt in alle drie scenario's biomassa ingezet (in de huidige chemische industrie wordt hiervoor aardolie gebruikt). De energie die nodig is om de basis chemicaliën om te zetten in gefunctionaliseerde chemicaliën is niet meegenomen, deze extra energie is nodig bij scenario 1 en 2, maar bij scenario 3 worden de gefunctionaliseerde moleculen direct gemaakt en is dus geen additionele energie nodig. Hier moet wel bij worden aangetekend met scenario 3 niet het volledige huidige productenpalet van de chemie kan worden geproduceerd, onder dit scenario zou een deel van de huidige (consumenten)eindproducten uit andere kunststoffen dan nu moeten worden gemaakt. Verder is er gekeken naar drie verschillende groeiscenario's voor de Europese chemie.

In onderstaande tabel staat (nogmaals) de behoefte aan biomassa onder de verschillende scenario's en aannames. In de berekeningen is in alle gevallen uitgegaan van een biomassa-grondstof bestaande uit 75% koolhydraten (cellulose en hemicellulose, die weer zijn opgebouwd uit glucose-eenheden) en 25% lignine.

| <i>Scenario</i> | | <i>Biomassa 'krimp'</i> | <i>Biomassa 'lage groei'</i> | <i>Biomassa 'sterke groei'</i> |
|-----------------|---|-----------------------------|----------------------------------|------------------------------------|
| 1 | Vergassing + FT | 173 Mt | 237 Mt | 323 Mt |
| 2 | Fermentatie + thermochemische omzetting | 168 Mt | 230 Mt | 317 Mt |
| 3 | Fermentatie + polymerisatie naar 'all-purpose' PLA | 123 Mt | 169 Mt | 232 Mt |

4.2 Verschillen tussen scenario 1 en 2

Opvallend is dat de hoge temperatuurprocessen (vergassing) en de fermentatieprocessen tot de huidige basischemicaliën allebei ongeveer evenveel biomassa vragen. Dit is het gevolg van het feit dat, ondanks dat het om totaal verschillende technologieën gaat, dezelfde bijproducten worden gevormd (CO_2 en water), en daarmee de koolstofefficiëntie, althans op papier, dezelfde is. Wel kan het zo zijn dat de benodigde hoeveelheden biomassa voor het genereren van *procesenergie* in werkelijkheid verschillen. Vergassing van biomassa, en de vervolgomzetting naar de platformchemicaliën, kan pas energie-efficiënt worden uitgevoerd als de schaal voldoende groot is. Dit heeft consequenties voor de logistiek, omdat voor voldoende toevoer van biomassa naar vergassingsinstallaties veel transportkilometers moeten worden gemaakt. Naast de hoge investeringskosten is dit van invloed op de haalbaarheid van deze technologie. Fermentaties zijn op veel kleinere schaal al energie-efficiënt, en kunnen dus ook in een kleiner landbouwgebied worden toegepast.

4.3 Koolstofefficiency in de biobased chemie.

Duidelijk is dat de productie van de huidige, op koolwaterstoffen gebaseerde chemicaliën en kunststoffen (scenario's 1 en 2) veel meer biomassa (en dus landoppervlak) vereist dan wanneer (nieuwe) producten worden gemaakt waarvan de samenstelling (in termen van koolstof- en zuurstofgehaltes) meer lijkt op die van de gebruikte biomassa (scenario 3). De minimale hoeveelheid biomassa voor scenario 3 is ca. 70% van die voor scenario's 1 en 2.

4.4 Het verschil in energie-efficiency tussen de scenario's.

Een wezenlijk verschil tussen scenario's 1 en 2 enerzijds en scenario 3 anderzijds is het feit dat in scenario 3 een *eindproduct* (PLA) wordt gemaakt, terwijl in scenario's 1 en 2 *basischemicaliën* worden geproduceerd die nog moeten worden omgezet in eindproducten (met name kunststoffen, maar ook oplosmiddelen en overige gefunctionaliseerde chemicaliën). Er is dus nog een aantal stappen nodig om uit de basischemicaliën plastics en andere eindproducten te maken (zie ook Figuur 2.1 in Hoofdstuk 2). Hoewel dit geen invloed heeft op de benodigde hoeveelheid biomassa die in de chemicaliën terechtkomt (er hoeft bij het maken van de plastics en andere eindproducten geen extra koolstof te worden ingebouwd), heeft dit wel invloed op de hoeveelheid biomassa die nodig is voor het genereren van de energie die nodig is om de eindproducten te maken. Om hoeveel additionele biomassa het gaat is moeilijk in te schatten (sommige processen genereren zelfs warmte die elders in het proces kan worden ingezet), maar het verschil met de biomassabehoefte volgens scenario 3 zal alleen maar groter zijn.

4.5 Grondstofdiversificatie onder scenario 3.

Scenario 3 gaat uit van de productie van gefunctionaliseerde moleculen direct uit de biomassa. In de huidige studie is telkens aangenomen dat de biomassa waaruit de producten worden gemaakt bestaat uit 75% koolhydraten en 25% lignine. Biomassa bevat, afhankelijk van het gewas, ook andere componenten, zoals eiwitten en oliën/vetten. Bos en Sanders (2013) hebben op basis van een iets andere berekening methode (qua omvang vergelijkbaar met het “lage groei” scenario) voor de productie van het huidige palet aan chemicaliën een inschatting gemaakt van de noodzakelijke hoeveelheden biomassa. Hierbij hebben ze ook gekeken naar de situatie dat niet alleen koolhydraten en lignine worden ingezet, maar ook eiwitten en oliën voor die producten die eenvoudiger uit deze twee laatste biomassacomponenten kunnen worden geproduceerd.

Zij komen tot de volgende getallen om de volledige Europese chemie van biomassa te voorzien: 80 tot 100 Mton koolhydraten, afhankelijk of eenvoudig om te zetten koolhydraten (zetmeel of suiker, het lage getal) of lastiger om te zetten koolhydraten (cellulose, het hoge getal) worden gebruikt. Daarnaast zijn benodigd 26 Mton lignine, 5 Mton glycerol uit natuurlijke oliën, 13 Mton eiwitten en 6 Mton ongespecificeerde biomassa. Verder geven ze aan nog 19 tot 27 ton biomassa nodig te hebben voor procesenergie. Ze komen tot een totale biomassavraag tussen de 149 en 177 Mton wanneer zoveel mogelijk gefunctionaliseerde chemicaliën worden geproduceerd, zeer vergelijkbaar met het getal dat uit deze studie komt. Uit de studie van Bos en Sanders blijkt dat koolhydraten en lignine zeer waarschijnlijk de grootste hoeveelheid biomassa zullen leveren aan de chemische industrie in een biobased economy, maar dat grofweg een derde van de vraag door andere componenten zou kunnen worden ingevuld, waardoor gewassen nog efficiënter zouden kunnen worden ingezet, meer van het gewas kan worden gebruikt voor de eindproducten.

5 Literatuur

- Blaauw, R., Haveren, J. van, Scott, E.L., Bos, H.L. (2008). Biomass for the Dutch Chemical Industry. Rapport voor BO-03-04.
- Bos, H.L. and Sanders J.P.M., Raw material demand and sourcing options for the development of a biobased chemical industry in Europe, Part 1: Estimation of maximum demand. BioFPR, in press
- Bozell, J.J. and Petersen, G.R. (2010). Technology development for the production of biobased products from biorefinery carbohydrates-the US Department of Energy's "Top 10" revisited. *Green Chemistry* **12**, pp. 539-554.
- Broeren, M.L.M., Saygin, D., Patel, M.K. (2012). Forecasting the energy use and CO₂ emissions of the energy-intensive chemicals production in the industrialized and developing countries until 2030. Unpublished results.
- Delhomme, C., Wuester-Botz, D., Kühn, F.E. (2008). Succinic acid from renewable resources as a C₄ building-block chemical-a review of the catalytic possibilities in aqueous media. *Green Chemistry* **11**, pp. 13-26.
- ECN/PBL (2010). Referentieraming energie en emissies 2010-2020. ECN-E—10-004, PBL 500161001, April 2010. Energy research Centre of the Netherlands, Petten, the Netherlands.
- Eerhart, A.J.J.E., Faaij, A.P.C., Patel, M.K. (2012). Replacing fossil based PET with biobased PEF; process analysis, energy and GHG balance. *Energy and Environmental Science* **5**, pp. 6407-6422.
- FAOSTAT (2012). Production statistics of crops.
- Hamelinck, C. and Faaij, A. (2002). Future prospects for production of methanol and hydrogen from biomass. *Journal of Power Sources* **111** (1), pp. 1-22.
- IEA (2009). Energy Technology Transitions for Industry – The Next Industrial Revolution. OECD/IEA, Paris, France.
- Jeon, J-K., Kim, D.H., Park, H-K. (2012). Butanol Dehydration over Tungsten Oxide/MCM-41 catalysts.
- Kochar, N.K., Merims, R., Padia, A.S. (1981). Ethylene from Ethanol. CEP June 1981, pp. 66-70.
- Patel, M., Jochem, E., Marscheider-Weidemann, F., Radgen, P., von Thienen, N. (1999). C-STRÖME: Abschätzung der Material-, Energie- und CO₂-Ströme für Modellsysteme in Zusammenhang mit dem nichtenergetischen Verbrauch, orientiert am Lebensweg – Stand und Szenarienbetrachtung. Band 1: Abschätzung für das Gesamtsystem). October 1999. Fraunhofer ISI, Karlsruhe, Germany. (in German).

- Patel, M.K., Crank, M., Dornburg, V., Hermann, B., Roes, L. *et al.* (2006). Medium and long-term opportunities and risks of biotechnological production of bulk chemicals from renewable resources – The BREW project. Prepared under the European Commission’s GROWTH Programme (DG Research). Co-ordinated by Utrecht University (UU), Dept. of Science, Technology and Society (STS), Utrecht, Netherlands; Final report, 420 pages, September 2006.
- Roes, A.L. and Patel, M.K. (2011). Ex-ante environmental assessment of novel technologies – Improved caprolactam catalysis and hydrogen storage. *Journal of Cleaner Production* **19** (14), pp. 1659-1667.
- Shen, L., Worrell, E., Patel, M. (2009). Present and future development in plastics from biomass. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining* **4** (1), pp. 25-40.
- Stanley, S., de Barros, J., Gardner, F. (2012). Increasing petrochemicals project earnings by upgrading steam cracker C4s and C5s. 1st Indian Oil Petrochemical Conclave, March 16, 2012. New Delhi, India.
- Tuchibana, Y., Masuda, T., Funabashi, M., Kunioka, M. (2010). Chemical synthesis of fully biomass-based poly(butylene succinate) from Inedible-Biomass-Based Furfural and Evaluation of Its Biomass Carbon Ratio. *Biomacromolecules* **11**, pp. 2760-2765.
- Vink, E.T.H., Davies, S., Kolstad, J.J. (2010). The eco-profile for current Ingeo® polylactide production. *Industrial Biotechnology*, August 2010, pp. 212-224.
- Wu, M., Wang, M., Liu, J., Huo, H. (2007). Life-Cycle Assessment of Corn-Based Butanol as a Potential Transportation Fuel. ANL/ESD/07-10, November 2007. Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois.
- Zeikus, J.G., Jain, M.K., Elankovan, P. (1999). Biotechnology of succinic acid production and markets for derived industrial products. *Applied Microbial Biotechnology* **51**, pp. 545-552.

Appendix bij De biomassabehoefte van de chemische industrie in een *bio-based economy*

Inschattingen gebaseerd op drie ideaaltypische technologische scenario's

BO-12.05-002-030

Rolf Blaauw
Harriëtte Bos
Jaap van Hal (ECN)
Değer Saygın (UU)
Martin Patel (UU)

Rapport nr. 1376 A

Colofon

| | |
|------------------|--|
| Titel | De biomassabehoeft van de chemische industrie in een bio-based economy |
| Auteur(s) | R. Blaauw; H.L. Bos; J. van Hal; D. Saygin; M.K. Patel |
| Nummer | 1376 |
| ISBN-nummer | 978-94-6173-489-1 |
| Publicatiedatum | Januari 2013 |
| Vertrouwelijk | Nee |
| OPD-code | 6220021800 |
| Goedgekeurd door | Bert Annevelink |

Wageningen UR Food & Biobased Research
P.O. Box 17
NL-6700 AA Wageningen
Tel: +31 (0)317 480 084
E-mail: info.fbr@wur.nl
Internet: www.wur.nl

© Wageningen UR Food & Biobased Research, instituut binnen de rechtspersoon Stichting Dienst Landbouwkundig Onderzoek

Alle rechten voorbehouden. Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand of openbaar gemaakt in enige vorm of op enige wijze, hetzij elektronisch, hetzij mechanisch, door fotokopieën, opnamen of enige andere manier, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgever. De uitgever aanvaardt geen aansprakelijkheid voor eventuele fouten of onvolkomenheden.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system of any nature, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publisher. The publisher does not accept any liability for inaccuracies in this report.

Inhoudsopgave

| | |
|--|----------|
| Appendix to “De biomassabehoeftte van de chemische industrie in een <i>bio-based economy</i>”, refinement of scenario 3 | 4 |
| A.1 Introduction and background information | 4 |
| A.2 Methodology | 4 |
| A.2.1 Production growth of EU-27 chemical industry | 4 |
| A.2.2 <i>Strategies for bio-based chemical industry</i> | 7 |
| A.2.2.1 Polylactic acid (PLA) route | 8 |
| A.2.2.2 Polybutylene succinate (PBS) route | 8 |
| A.2.2.3 Main existing polymers route | 9 |
| A.3 Results | 10 |

Appendix to “De biomassabehoefte van de chemische industrie in een *bio-based economy*”, refinement of scenario 3

A.1 Introduction and background information

This paper provides the contribution of Utrecht University to the project on biomass logistics assigned by the Dutch Ministry of Economic Affairs. In Section A.2 we explain our methodology, and in Section A.3 we provide the detailed results of our analysis.

A.2 Methodology

The objective of this analysis is to quantify the total biomass demand in the countries of the European Union (EU-27) if petrochemical-based *functionalized polymers* were to be produced by bio-based feedstocks. We analyze the total biomass demand in 2030. We therefore provide the production growth estimates of the basic chemicals and polymers in the period 2010-2030 in Section A.2.1. Next we identify the main production routes for functionalized polymers and for each route we provide a quantitative overview of the material flows and the basic assumptions (Section A.2.3).

A.2.1 Production growth of EU-27 chemical industry

We establish three production growth scenarios, namely low, medium and high by considering the potential developments in economy, trade structure of the global chemical industry as well as energy and climate policies. We separately analyze the basic chemicals (ethylene, propylene, butadiene, aromatics) and polymers/fibers. An overview of the main assumptions is already given in Table 2.2 (Chapter 2). They are based on the work by Broeren *et al.* (2012).

According to Tables 2.2 and 2.3, and Figure A.1 through Figure A.3, Broeren *et al.* (2012) estimate that the production of basic chemicals will grow on average by -0.2% p.a. (per annum) between 2010 and 2030. The *average* scenario is in line with the production growth scenarios of the International Energy Agency (IEA, 2009) for OECD Europe for the period 2006-2050. The same study by IEA (2009) projects that the polymer industry will be the fastest growing segment of the chemical industry. We therefore assume that EU-27 polymer industry will grow slightly higher than the basic chemicals production, on average by 0.6% p.a. This means that in addition to domestic production of intermediate chemicals, EU-27's chemical industry will also partly rely on imports of these chemicals to meet the increasing demand for polymers production. Based on the average growth patterns, the total production of basic chemicals in 2030 (53 megatonnes (Mt) per year) would be similar to today's level of production (55 Mt/yr), including the production of propylene and aromatics from refinery sources. In the same period, total production of polymers and fibers would be 10% higher compared to today (56 Mt versus 63 Mt). Currently the ratio of

basic chemicals production to that of polymers and fibers is 0.95. However, as polymers production will grow faster than basic chemicals production, this ratio would change to 1.16 by 2030.

Depending on the possible developments in economic growth, changes in trade patterns (more chemicals trade across the world regions or more domestic production) and introduction of new energy and climate policies (e.g. CO₂ tax), production growth could differ from the average rates we estimated. In the case where importing chemicals is cheaper than domestic production, EU-27 production could shift to other countries. This is represented by the *low* scenario where basic chemicals production decreases by -1.7% p.a., resulting in a difference of -29% between today's production levels of 55 Mt and 2030 levels of 39 Mt. Likewise the production of polymers and fibers would decrease by -0.7% p.a. (or 14%) in the same period from 56 Mt to 48 Mt.

Compared to a low scenario where EU-27 loses production capacity of its chemical industry, EU could implement policies to maintain the sector's competitiveness. Consequently, the capacity could increase along with the global demand for basic chemicals and polymers. According to the *high* scenario, the production of basic chemicals and polymers and fibers would grow by 1.4% and 1.9% p.a. respectively between 2010 and 2030. The high scenario for basic chemicals production follows the projections of ECN/PBL (2010) for the case of the Netherlands. Similarly, the production of polymers is slightly below the world average (2-2.5% p.a.) according to IEA (2009). According to this scenario, the total production of basic chemicals, and polymers and fibres would be 30% and 45% higher than today's levels by 2030 respectively.

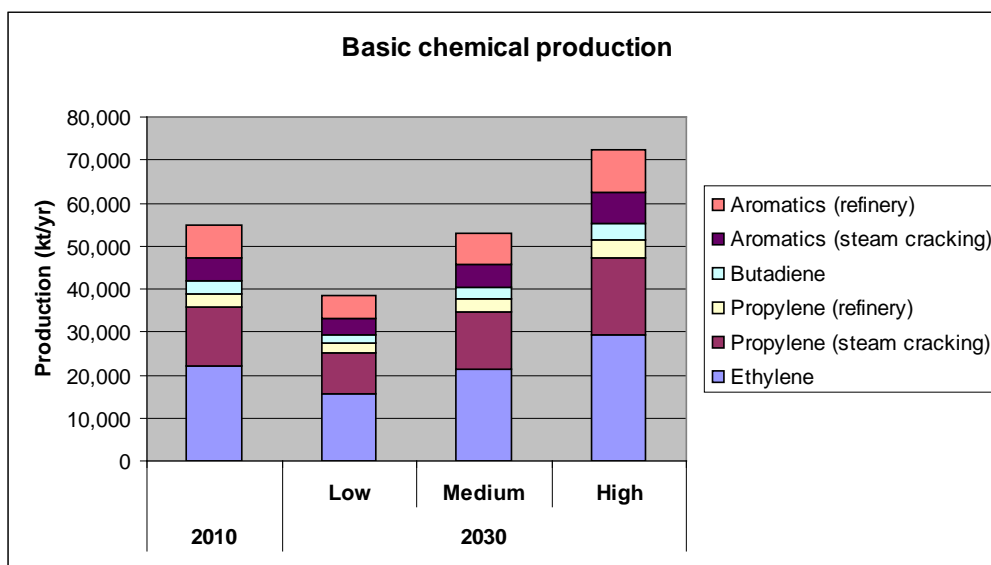


Figure A.1. Current (2010) production volume of basic chemicals in the EU-27 chemical industry and projections until 2030

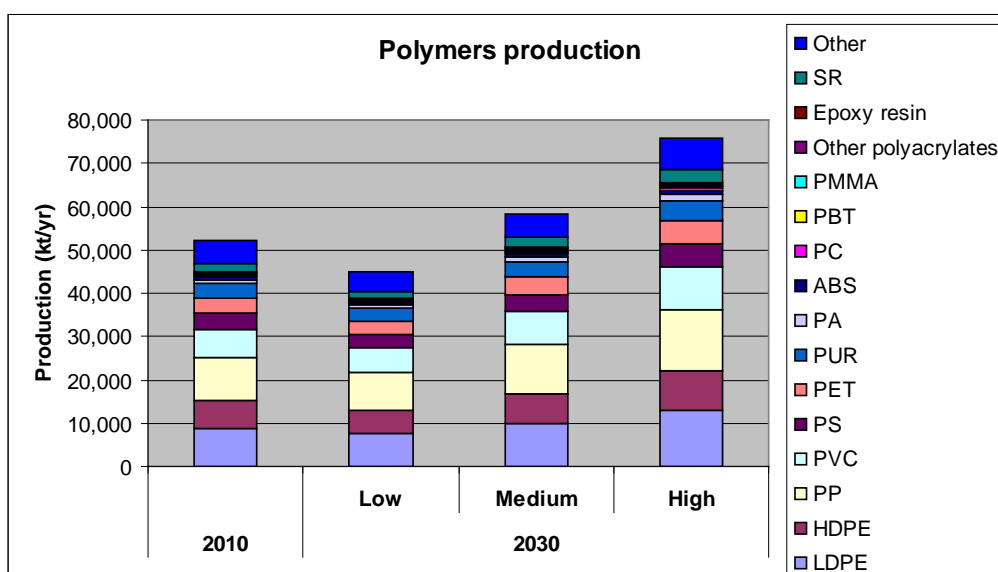


Figure A.2. Current (2010) production volume of polymers in the EU-27 chemical industry and projections until 2030

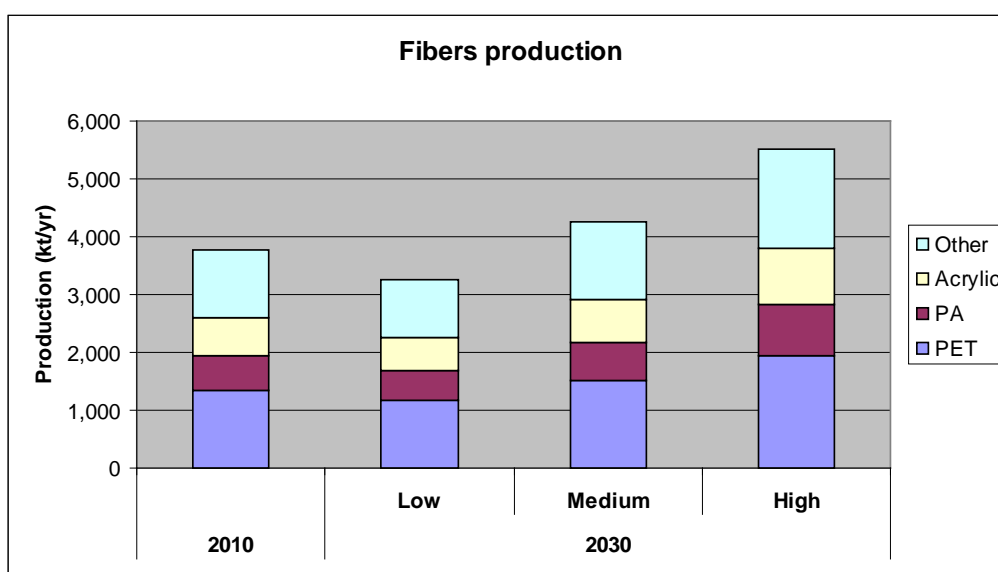


Figure A.3. Current (2010) production volume of fibres in the EU-27 chemical industry and projections until 2030

A.2.2 Strategies for bio-based chemical industry

We identify three production routes to substitute petrochemical-based functionalized polymers with bio-based feedstocks (i.e. corn, sugar cane). The first two routes are based on the fermentation of sugars to all-purpose new bio-based polymers, namely polylactic acid (PLA) based on lactic acid (Section A.2.2.1) and polybutylene succinate (PBS) based on succinic acid (Section A.2.2.2). The third route is the conversion of sugars to main existing polymers or to polymers which can directly substitute polyethylene terephthalate (PET), polyamide (PA) (i.e. nylons) and polyacrylates (Section A.2.2.3). For each route we evaluate the production of polymers from corn and sugar cane feedstocks which are first utilized to produce sugar (see Table A.1). We explain the details of each route in the following sections.

Table A.1. Input and output table for biomass feedstocks for sugar, chemicals and polymers production

| | Input | Output | Higher heating value of biomass feedstocks | Reference |
|-----------------|-------|-----------|--|----------------------------|
| | (t) | (1 tonne) | (GJ/t) | |
| Corn | 1.1 | Dextrose | 16.3 | Patel <i>et al.</i> (2006) |
| Sugar cane | 7.1 | Sucrose | 5.0 | Patel <i>et al.</i> (2006) |
| Residue biomass | - | - | 18.0 | Hamelinck and Faaij (2002) |

A.2.2.1 Polylactic acid (PLA) route

Polylactic acid (PLA) can technically replace 10% of total high density polyethylene (HDPE), polypropylene (PP), polystyrene (PS) and polyamide (PA) production as well as 20% and 5% of the total polyethylene terephthalate (PET) and polymethyl methacrylate (PMMA) production respectively (Shen et al., 2009). This is equivalent to a substitution potential of 9% for the total production volume of these chemicals. Compared to the total production volume of EU-27's polymer industry's it is a substitution potential of 5%. Table A.2 shows the input and outputs to the production of PLA.

Table A.2. Input and output table for Strategy 1: Polylactic acid (PLA).

| | Input | Output | Reference |
|------------|--------------|---------------|--|
| | (t) | (1 tonne) | |
| Sugar | 1.5 | PLA | Vink <i>et al.</i> (2010) |
| | | | |
| Corn | 1.5 | PLA | Vink <i>et al.</i> (2010); see Table A.1 |
| Sugar cane | 10.4 | PLA | see Table A.1 |

A.2.2.2 Polybutylene succinate (PBS) route

This route identifies the substitution of all polypropylene (PP) production with polybutylene succinate (PBS). PBS is produced from succinic acid and 1,4-butanediol (BDO) (a derivative of succinic acid). By substituting all PP production, PBS has the potential to substitute 19% of EU-27's total polymer production volume. Table A.3 shows the input and outputs to the production of PLA.

Table A.3. Input and output table for Strategy 2: Polybutylene succinate (PBS) route.

| | Input | Output | Reference |
|----------------------|--------------|----------------------|---|
| | (t) | (1 tonne) | |
| Sugar | 1.1 | Succinic acid | Zeikus et al. (1999); Bozell and Petersen (2010) |
| | | | |
| Succinic acid | 1.2 | 1,4-Butanediol (BDO) | Delhomme <i>et al.</i> (2009) |
| 1,4-Butanediol (BDO) | 0.5 | PBS | Tachibana <i>et al.</i> (2010) |
| Succinic acid | 0.5 | PBS | Tachibana <i>et al.</i> (2010) |
| | | | |
| Succinic acid | 1.1 | PBS | Delhomme <i>et al.</i> (2009); Tachibana <i>et al.</i> (2010) |
| | | | |
| Sugar | 1.2 | PBS | |
| | | | |
| Corn | 1.3 | PBS | see Table A.1 |
| Sugar cane | 8.6 | PBS | see Table A.1 |

A.2.2.3 Main existing polymers route

For this analysis, we identify three functionalized chemicals, namely PET, polyacrylates (various grades and PMMA) and polyamides (PA). The total production of these chemicals account for 10% of the EU-27 polymer industry's total production volume.

For each petrochemical, we identify the following bio-based routes:

- Bio-based polyacrylic acidesters production via bio-based propylene through metathesis of ethylene and butylene, and bio-based methanol (Hamelinck and Faaij, 2002) to replace polyacrylates (PMMA and other polyacrylates),
- Polyethylene furandicarboxylate (PEF) production to replace PET,
- Bio-based polyamide production via caprolactam to replace polyamides

Table A.4. Input and output table for Strategy 3: main existing polymers route.

| | Input | Output | Reference |
|--|-------|-----------------------|------------------------------|
| | (t) | (1 tonne) | |
| a) Acrylates | | | |
| Ethanol | 1.7 | Ethylene | Kochar <i>et al.</i> (1981) |
| Sugar | 3.6 | Butanol | Wu <i>et al.</i> (2007) |
| Butanol | 2.3 | 2-butene | Jeon <i>et al.</i> (2012) |
| 2-butene | 0.7 | Propylene | Stanley <i>et al.</i> (2012) |
| Ethylene | 0.3 | Propylene | Stanley <i>et al.</i> (2012) |
| Biomass residues | 2.9 | Methanol | Hamelinck and Faaij (2002) |
| Propylene | 0.6 | Polyacrylicacidesters | Patel <i>et al.</i> (1999) |
| Methanol | 0.4 | Polyacrylicacidesters | Patel <i>et al.</i> (1999) |
| Sugar | 3.4 | Polyacrylicacidesters | |
| Corn | 3.6 | Polyacrylicacidesters | see Table A.1 |
| Sugar cane | 24.1 | Polyacrylicacidesters | see Table A.1 |
| Biomass residues | 1.1 | Polyacrylicacidesters | see Table A.1 |
| b) Polyethylene furandicarboxylate (PEF) (incl. bio-based EG) | | | |
| Sugar | 3.3 | PEF | Eerhart <i>et al.</i> (2012) |
| Corn | 3.5 | PEF | see Table A.1 |
| Sugar cane | 23.8 | PEF | see Table A.1 |
| c) Polyamides (petrochemical-based syngas) | | | |
| Ethanol | 4.5 | Butadiene | Patel <i>et al.</i> (2012) |
| Butadiene | 0.6 | 3-pentenamide | Roes and Patel (2011) |
| 3-pentenamide | 1.1 | Caprolactam | Roes and Patel (2011) |
| Capolactam | 1.1 | Polyamide | Industry sources |
| Sugar | 4.6 | Polyamide | |
| Corn | 4.9 | Polyamide | see Table A.1 |
| Sugar cane | 32.9 | Polyamide | see Table A.1 |

A.3 Results

The results of our analysis are summarized in Table A.5 and Figure A.4. We estimate a total corn demand of 5 Mt, 14 Mt and 24 Mt for Strategy 1 (PLA route), 2 (PBS route) and 3 (functionalized polymers route) respectively in 2030. Total demand of sugar cane is approximately by a factor 8 higher than for corn at 33 Mt, 96 Mt and 161 Mt for Strategies 1-3 respectively. The total substitution potential of petrochemical-based polymers for each strategy is estimated as 3.2 Mt, 11.1 Mt and 5.6 Mt per year respectively. This is equivalent to between 1.3 (PBS route) and 4.3 (functionalized polymers route) tonnes of corn demand and between 10.4 and 8.6 tonnes of sugar cane demand per tonne of petrochemical-based polymer. Compared to polyacrylate (0.5 Mt) and polyamides (1.0 Mt) production volumes, given the large PET market (4.1 Mt in 2030), PEF accounts for 70% of the total substitution potential in Strategy 3.

By assuming that the potentials of Strategies 2 and 3 are realized first (i.e. all PP, PMMA, polyacrylates, PET, PA are substituted) and then the potentials of Strategy 1 (PLA) (i.e. 10% of HDPE and PS volumes are substituted), we estimate a total demand of 40 and 257 Mt/yr corn and sugar cane respectively. This combination of strategies can substitute a total of 17.8 Mt petrochemical-based polymers by 2030. This is equivalent to a substitution potential of 30%. If Strategy 1 (PLA) becomes successful first (i.e. 20% PET, 10% HDPE, PP, PS and PA and 5% PMMA are substituted) and then Strategies 2 and 3 substitute the rest of the production volumes of these chemicals, we estimate the same substitution potential of 17.8 Mt polymers. This combination of strategies would require 3% more corn and 5% less sugar cane compared to the case where Strategies 2 and 3 are followed by Strategy 1.

By multiplying the total demand for corn and sugar cane with their respective higher heating values (HHVs) provided in Table A.1, we estimate a total demand of 0.7-1.3 exajoules (EJ, =1,000 petajoules) for the combination of the three strategies. This is equivalent to about 37 gigajoules (GJ) of corn and 69 GJ of sugar cane per tonne of petrochemical polymer substituted. Total corn and sugar cane demand to substitute a total of 17.8 Mt polymers is 22% and 41% of the total fossil fuel feedstock demand of EU-27's chemical industry by 2030 respectively (3 EJ, estimated based on the production growth rates of the medium growth scenario, see Table 2.3 in Chapter 2). Compared to the current worldwide production of corn (840 Mt/yr in 2010) and sugar cane (1711 Mt/yr), the potential demand from EU-27's chemical industry is about 5% and 15% respectively (FAOSTAT, 2012).

Depending on the production growth rates provided in Table 2.3 in Chapter 2, total quantities of polymers substituted and the related feedstock demand in 2030 can change by +/-25% from the values provided in Table A.5 and Figure A.4.

Table A.5. Overview of results for each strategy for EU-27's chemical industry. Results represent the situation in 2030 assuming medium growth.

| | Substituted petrochemical based polymers | Total substituted polymers (Mt/yr) | Share of total production (%) | Total biomass demand (feedstock) ¹ | | | |
|---|--|---------------------------------------|----------------------------------|---|------------|---------|------------|
| | | | | Corn | Sugar cane | Corn | Sugar cane |
| | | | | (Mt/yr) | (Mt/yr) | (PJ/yr) | (PJ/yr) |
| Strategy 1: Polylactic acid (PLA) | 20% PET, 10% HDPE, PP, PS, PA, 5% PMMA | 3.2 | 5% | 4.8 | 32.7 | 79 | 161 |
| Strategy 2: Polybutylene succinate (PBS) | 100% PP | 11.1 | 19% | 14.2 | 96.0 | 232 | 474 |
| Strategy 3: Functionalized polymers | | 5.6 | 10% | 23.8 | 160.6 | 388 | 793 |
| a) Acrylates ² | 100% PMMA, polyacrylates | 0.5 | 1% | 2.2 | 14.6 | 35 | 72 |
| b) Polyethylene furandicarboxylate (PEF) (incl. bio-based EG) | 100% PET | 4.1 | 7% | 14.5 | 97.4 | 236 | 481 |
| c) Polyamides (petrochemical-based syngas) | 100% polyamide | 1.0 | 2% | 7.2 | 48.6 | 118 | 240 |
| Strategy 1-3 | 100% PET, PP, PMMA, PA, polyacrlates, 10% HDPE, PS | | | | | | |
| a) First others, then PLA | | 17.8 | 30% | 39.8 | 256.7 | 648 | 1268 |
| b) First PLA, then others | | 17.8 | 30% | 40.9 | 243.0 | 666 | 1201 |

¹ Feedstock energy demand is expressed in HHV and estimated by multiplying the absolute feedstock demands with the HHV values provided in Table 2.3 in Chapter 2. Related demand for process energy is excluded.

² Related to Acrylates route, a total of 550 kt/yr biomass residues are required for the production of bio-based methanol.

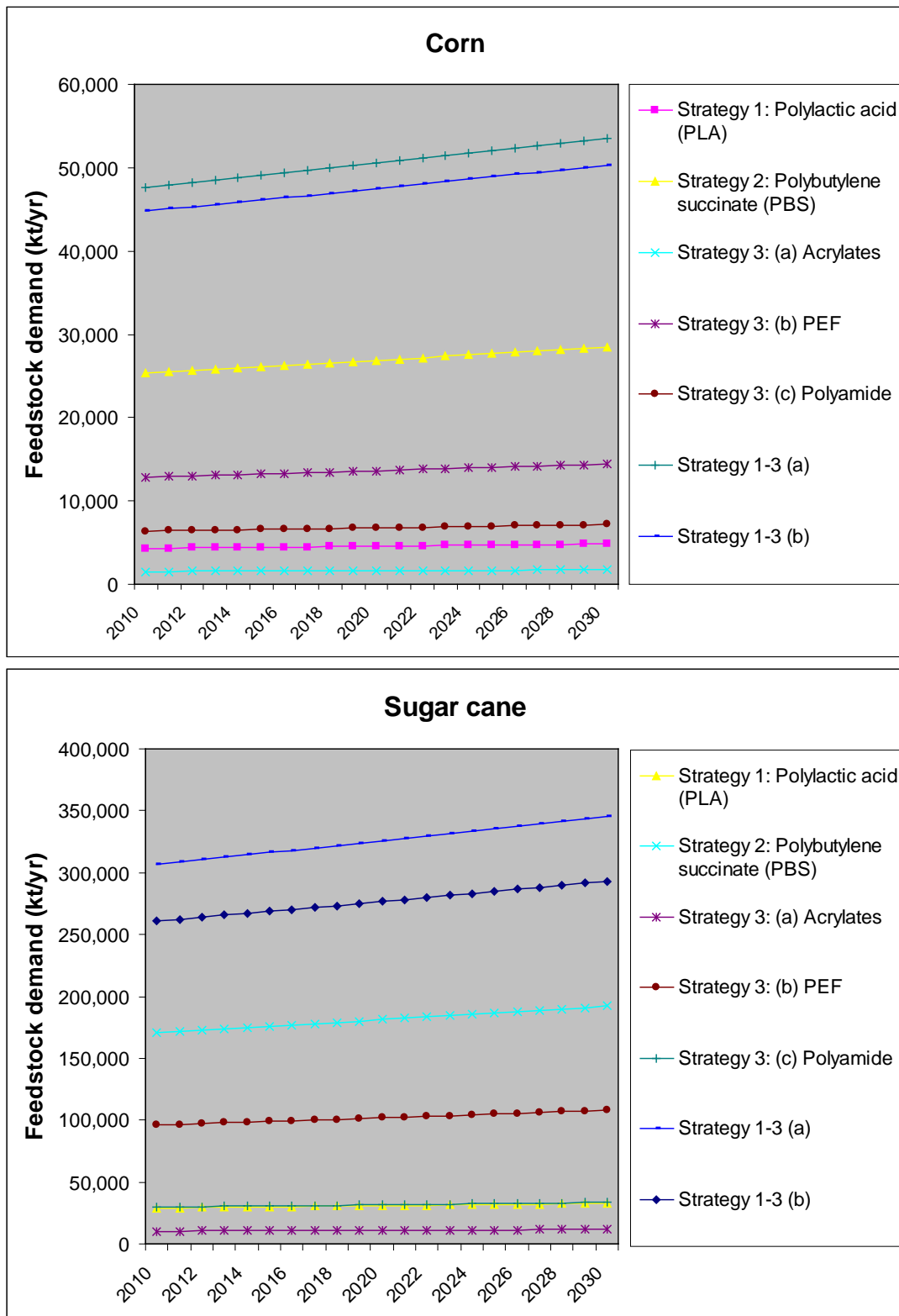


Figure A.4. Estimated corn and sugar cane demand between 2010 and 2030.